جامعة هواري بومدين
للعلوم والتكنولوجيا
U S T H B

UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE

FACULTE DE GENIE MECANIQUE ET DE GENIE DES PROCEDES

Département : DE GENIE CHIMIQUE ET DE CRYOGENIE

Master 1 GENIE CHIMIQUE

SIMULATEURS EN GENIE DES PROCEDES

2020/2021

Fait par : Pr N.BENDJABALLAH-LALAOUI

Sommaire

Chapitre 1 **De la Conception à l'Analyse des Procédés Assistées par Ordinateur**

Chapitre 2 **Différents types de Simulateurs de Procédés**

Chapitre 3 **Approche de modélisation et simulation: Approche modulaire séquentielle**

Chapitre 1

De la Conception à l'Analyse des Procédés Assistées par Ordinateur

I- Introduction

Les conditions économiques actuelles, les contraintes d'environnement et de sécurité conduisent à plus de rigueur dans la conception et la conduite des procédés de l'industrie chimique et para-chimique.

Dans ce contexte, on a de plus en plus souvent recours à l'informatique pour concevoir rapidement et économiquement de nouveau procédé (rentable, plus sûre et plus flexible) mais également pour analyser et optimiser le fonctionnement des installations existantes.

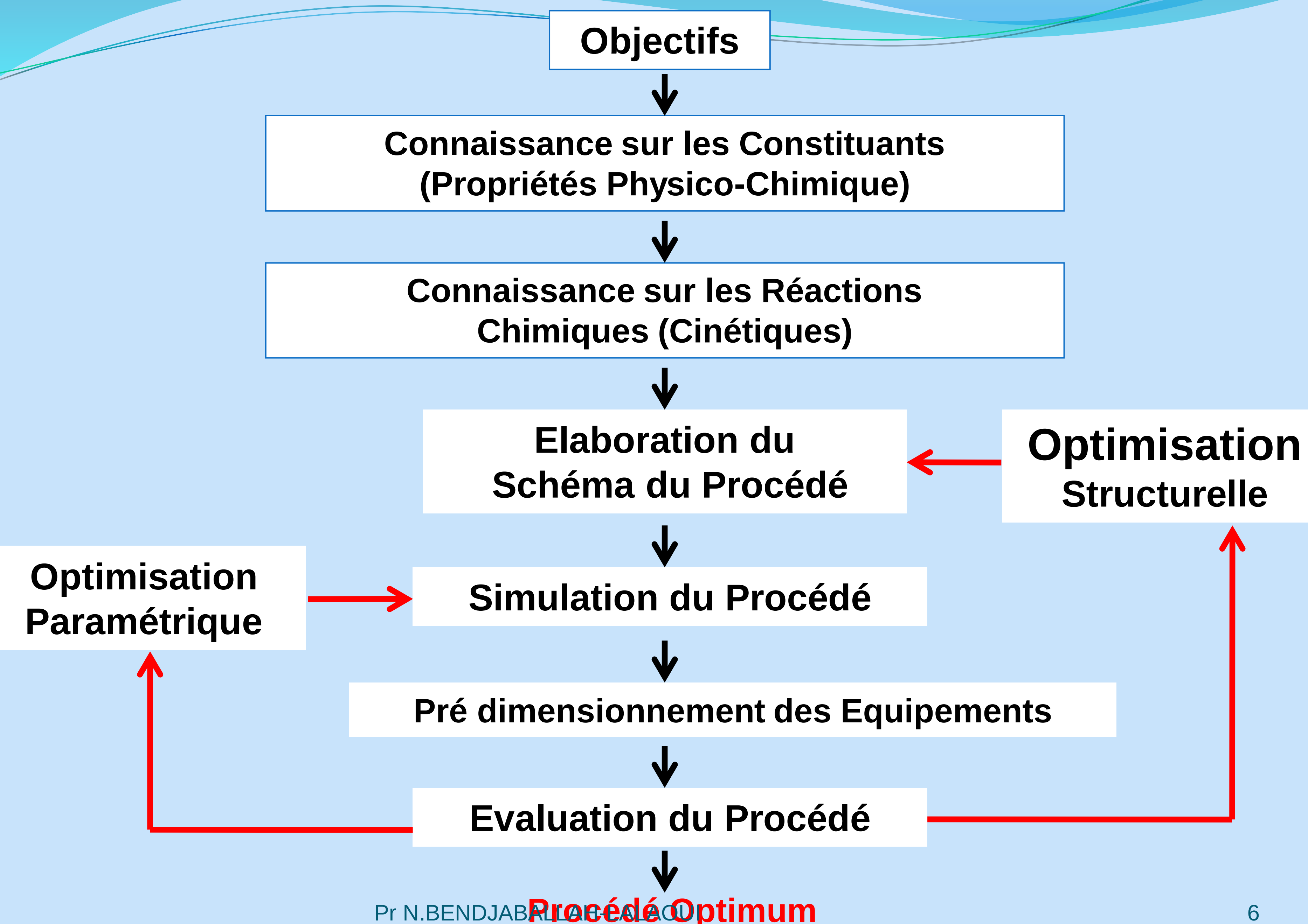
A ce jour, la conception et la conduite assistée par ordinateur sont une réalité de nombreux secteurs de l'industrie chimique et para-chimique grâce aux « Simulateurs de Procédé » appelés également « Programme de Flowsheeting » .

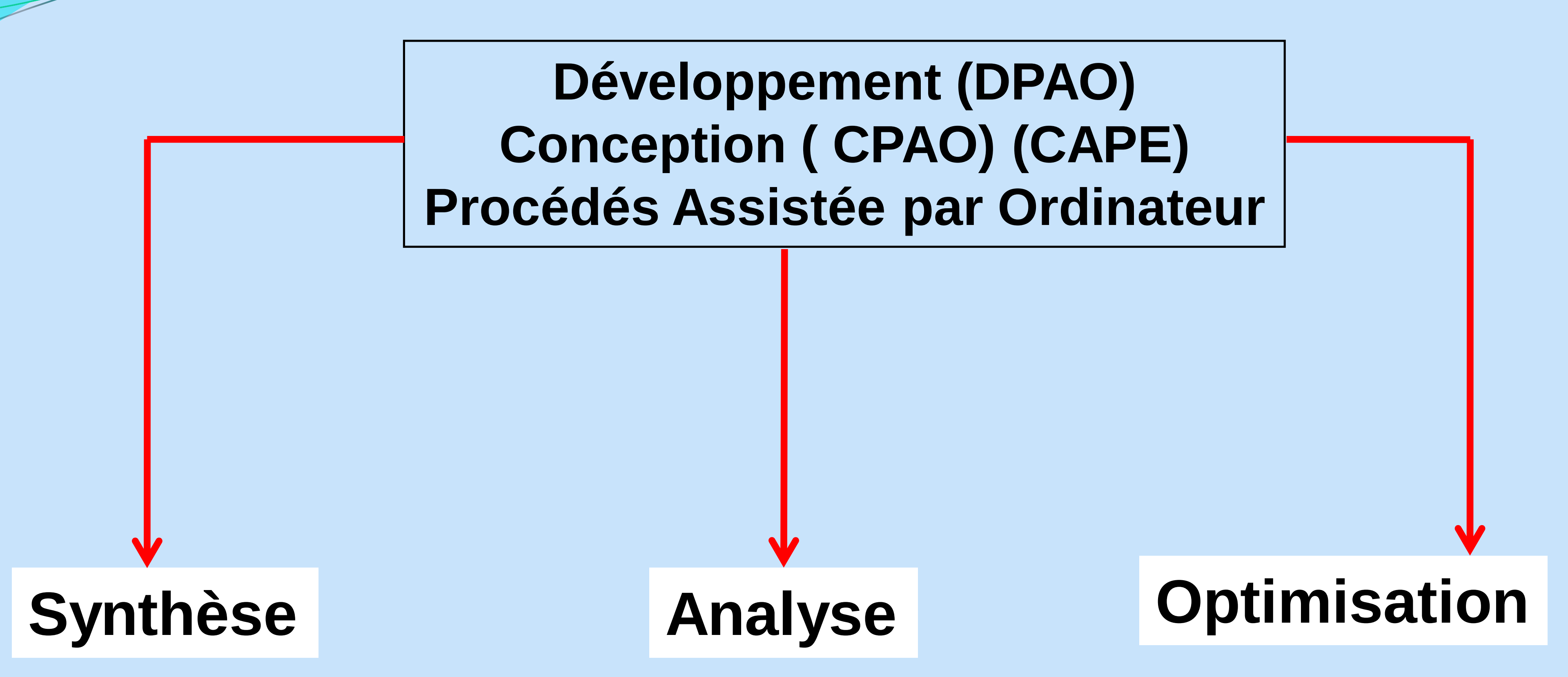
II- Conception d'un Procédé Assisté par Ordinateur (C.P.A.O)

- Après avoir clairement définie les objectifs à atteindre et réaliser quelques études préliminaires tel que : l'acquisition de connaissance sur les constituants (propriétés physico-chimiques, équilibre entre phase, cinétique de réaction…..). Le processus de conception d'un procédé comporte 3 étapes principales : synthèse, analyse, optimisation.

- L'organigramme suivant illustre les différentes étapes de la CPAO

Conception d'un Procédé Assistée par Ordinateur CPAO



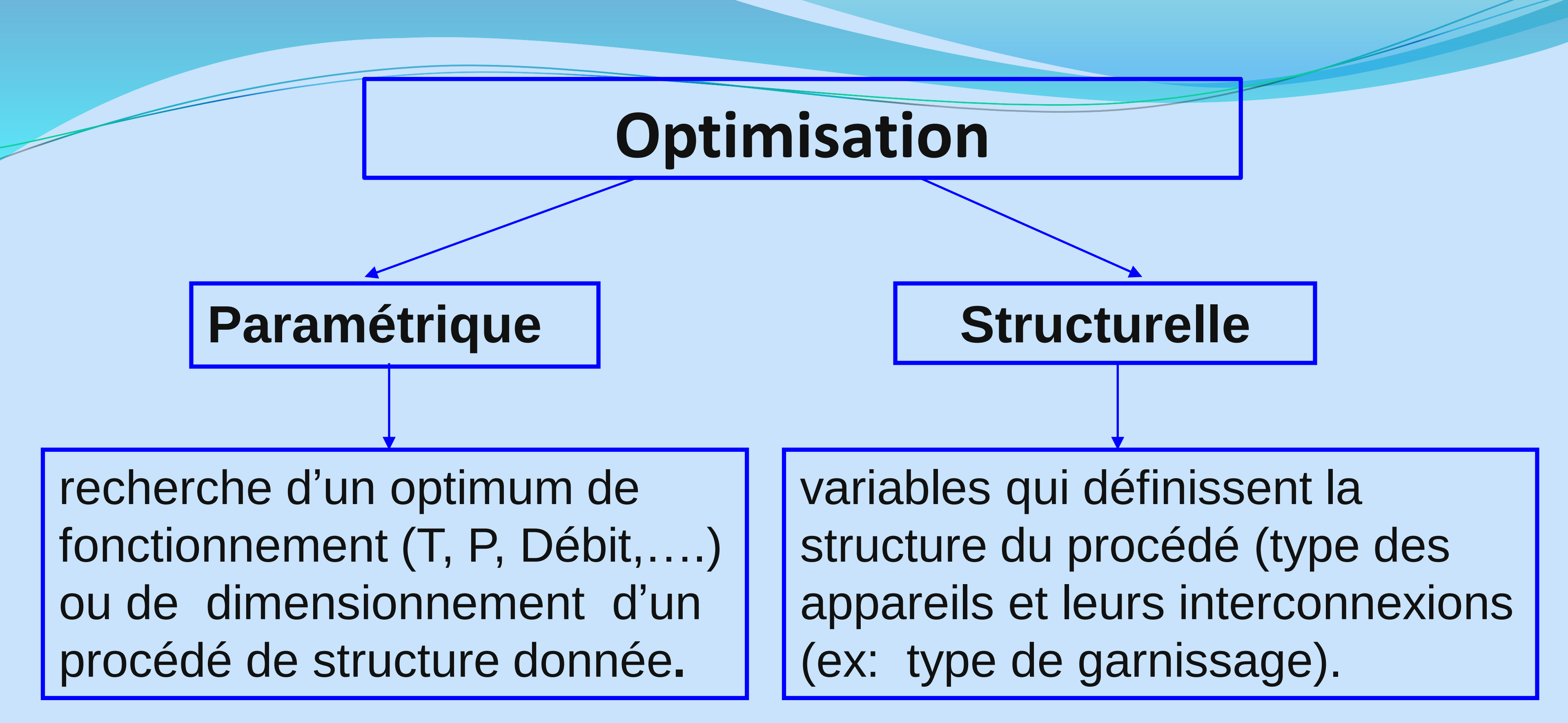

Développement (DPAO)
Conception (CPAO) (CAPE)
Procédés Assistée par Ordinateur
Synthèse
Analyse
Optimisation

Le processus de conception d'un procédé

Synthèse → choix de des appareils ou OPU et de leurs interconnexions.

Analyse →

- Etablissement des bilans de matière et d'énergie du procédé.
- Dimensionnement des équipements.
- Estimation de la valeur du procédé (rendement d'une réaction)

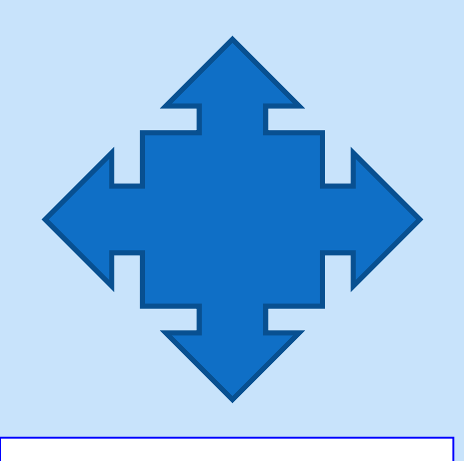


Le procédé final qui résulte de cette méthodologie de conception représente le procédé optimal. Au niveau de différentes étapes l’ordinateur permet d’alléger le travail de l’ingénieur en la déchargeant des calculs fastidieux et répétitifs.

III- De l'Analyse à la Conduite d'un Procédé Assistée par Ordinateur (APAO)

Une fois le procédé est conçu, il convient de le construire, le démarrer et assurer son fonctionnement dans les meilleures conditions possibles à savoir :

La rentabilité



L'aspect de l'environnement

La sécurité

Le procédé peut être vu comme un système ouvert qui échange avec le milieu extérieur de la matière, l'énergie et de l'information.

Il reçoit en entrée les matières premières et fournit en sortie les produits, les sous produits sous forme liquide, gaz, solide.

Le procédé c'est consommateur d'énergie ou fournisseur d'énergie.

L'Objectif de l'APAO s'intéresse aux formations échangées entre le procédé et le milieu extérieur. Elle exploite les données fournies par les mesures pour satisfaire au mieux les objectifs de production.

Les différents outils mis en œuvre pour l'analyse d'un procédé assisté par ordinateur APAO, illustrés sur la figure.

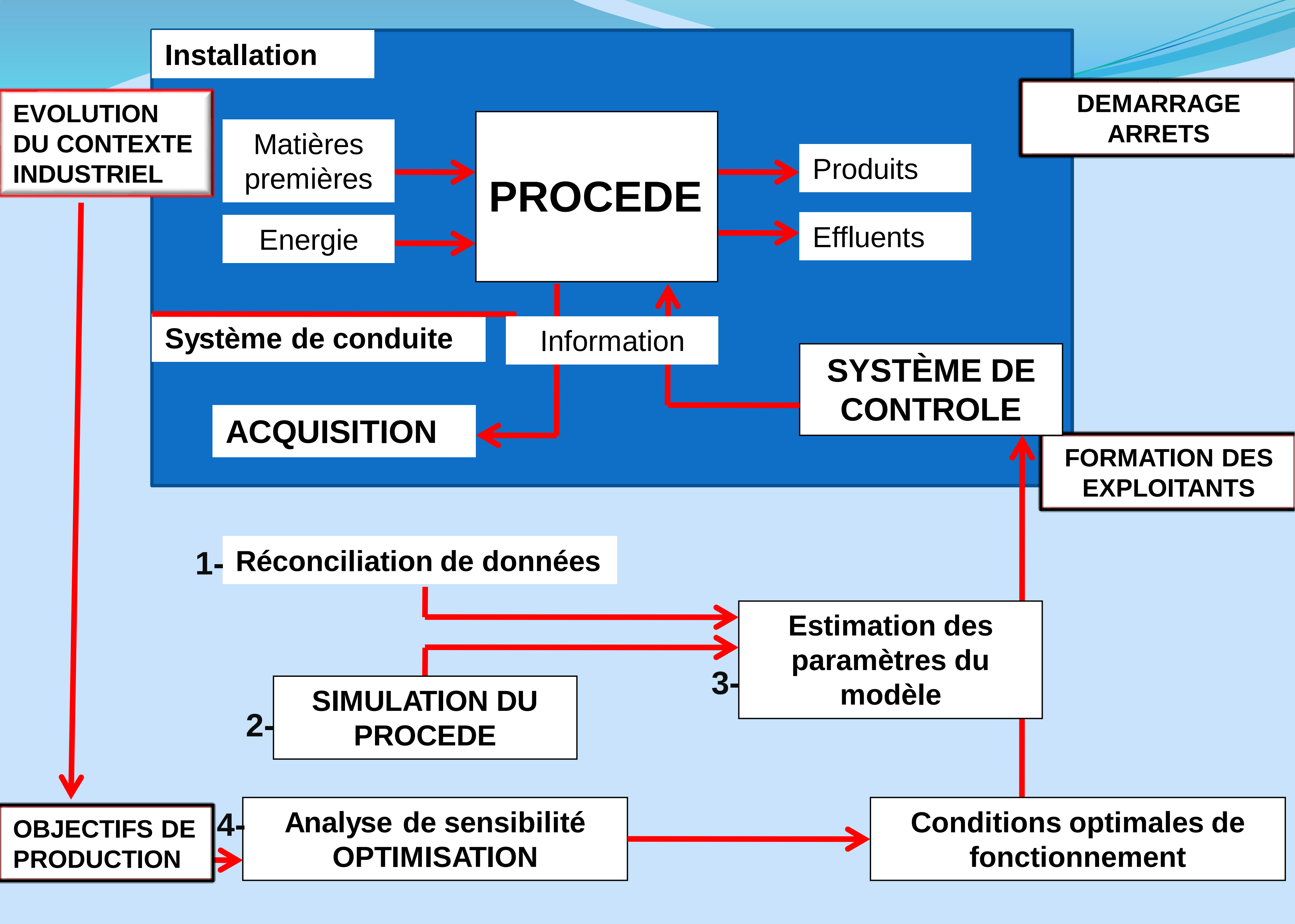


Figure Analyse et conduite d'un Procédé Assistée par Ordinateur

Les 04

1. La réconciliation de données

Consiste à un traitement statique des valeurs mesurées par le procédé (éliminer toute les erreurs possibles rencontrées lors de la mesure).

2. Simulation du procédé

les données réconciliées nous permet de constituer le modèle représentatif du fonctionnement du procédé. Les variables qui interviennent dans le modèle sont de 03 types:

- **Les variables d'état (**pression, débit, température…..),
- **Les paramètres (**constante cinétique, équilibre entre phase),
- **Les variables de commande.**

3. Identification du modèle

est la recherche des valeurs des paramètres qui **minimisent l'écart** entre les valeurs mesurées et les valeurs calculées par le simulateur. Cette étape a pour but d'ajuster le modèle à la réalité.

4. Analyse de sensibilité

sélectionne parmi l'ensemble des variables de commande celles qui sont prédominantes vis-à-vis des objectifs, elle permet de réduire la taille du problème d'optimisation qui suit.

Cette dernière étape fournie **les conditions optimales** de fonctionnent qui constitue **les points de consigne de système de contrôle.**

Chapitre 2

Différents Types de Simulateurs de Procédés

I- Objectifs des simulateurs

Les objectifs majeurs des simulateurs de procédés sont les suivants :

– résoudre les équations de bilans matière et énergie pour l'ensemble des appareils du procédé ;

– calculer les caractéristiques (débit, composition, température, pression, propriétés physiques) pour tous les fluides qui circulent entre les appareils ;

– fournir les éléments nécessaires au dimensionnement des équipements, tels que les quantités de chaleur échangées ou les débits internes d'une colonne.

À ces objectifs, s'ajoutent :

– l'estimation des coûts d'investissement et de fonctionnement et, dans un contexte de développement durable, de l'impact sur l'environnement et la sécurité ;

– l'optimisation des conditions de fonctionnement du procédé.

II- Simulateurs orientés module et orientés équation

- L'aspect fondamental pour la simulation des procédés est l'identification des composants élémentaires dont l'assemblage permet de construire le modèle de simulation du procédé. On aura par conséquent deux approches :

approche dite « **orientée module** » (OM) et l'approche dite « **orientée équation** » (OE).

1- Approche OM : elle est adoptée par la majorité des simulateurs commerciaux. Tels qu'Aspen Plus, HYSYS, ProSimPlus… . Dans cette 'approche, l'élément de base est l'opération unitaire. Elle correspond à la vision classique et naturelle du procédé qui résulte de l'agencement (arrangement) d'opérations unitaires destinées à une fonction précise telle que réaction ou séparation.

L'utilisateur sélectionne les modules élémentaires standardisés à partir de la bibliothèque du simulateur, il va fournir par la suite les paramètres de fonctionnement et de dimensionnement de ces modules, enfin il les relie entre eux par des **courants** représentant les flux de matière, d'énergie et d'information circulant entre les appareils du procédé réel.

2- Approche ou simulateurs OE L'élément de base dans cette approche est l'équation. Ces simulateurs apparaissent comme des solveurs de systèmes d'équations algébriques et différentielles (Fortran, Matlab,….)

Ils sont réputés plus efficaces que les simulateurs OM sur le plan Numérique. Par contre, les bibliothèques de modèles de ces simulateurs sont généralement très peu fournis.

Nous nous limiterons ici à une présentation des simulateurs basés sur une approche orientée module.

Ces simulateurs sont constitués de trois éléments essentiels :

1. Serveurs des propriétés physico-chimiques.
2. Serveurs des opérations unitaires
3. Bibliothèque des solveurs ou solveurs numériques.

Serveurs des propriétés physico-chimiques

Au cours de tout système de modélisation et de simulation se trouve le serveur des propriétés physico-chimiques.

Ce serveur repose sur un principe fondamental de la thermodynamique appliqué selon le quel le comportement de multi-constituants peut être déduit de la connaissance de comportement des corps purs et des binaires.

Les bases de données : les différentes bases des données les plus répondues sont :

- ***La base de données DIPPR (Design institut for physical property data) :*** Elle renferme un faible nombre d'espèces chimiques par rapport au nombre de substances spécifiques de référence.

- Les substances référencées sont des substances ayant un numéro d'enregistrement dans les CAS (*chemicals abstracts service* : c'est une division de société américaine son travail est de collecter et organiser toute les informations des substances confirmées pratiquement environ 14 millions en 1987).

La base de données la plus utilisée pour les propriétés thermodynamique est celle de REID 1981.

- ***Base de données pour les systèmes binaires :*** relative aux équilibres entre phases est la DECHEMA (Société Allemande pour le Génie Chimique et la Biotechnologie), elle comporte 14300 équilibres liquide-vapeur, 5600 équilibres liquide-liquide, 5250 données de solubilités des gaz, 8000 chaleurs de mélange, 600 chaleurs spécifiques, 28500 coefficients d’activité à dilution infinie, mais cela reste toujours très peu par rapport aux substances référencées 14 millions.

Méthodes d’estimation : elles sont utilisées pour la prédiction des équations entre phases.

- Pour les corps purs la méthode utilisée et celle décrite dans l’ouvrage Reid 1987.
- Pour des mélanges plus de deux constituants l’estimation des propriétés physico-chimiques, de ces mélange, à partir des modèles thermodynamiques par la méthode de UNIFAC (établie par Fredenslund et al 1975).

Modèles thermodynamiques : sont des corrélations et des équations d'état d'un système à l'équilibre thermodynamique.

Par exemple équation des gaz parfait :

PV=NRT

Bibliothèque ou serveur des OU

D'une manière générale, un module est un modèle phénoménologique ayant pour objectif de représenter le fonctionnement d'une opération unitaire telle que les procédés de séparation et les réacteurs.

Le modèle repose sur quelques lois fondamentales du génie des procédés :

-La conservation de la matière (bilan de matière).

-Le premier principe de thermodynamique (bilan thermique).

-Le deuxième principe de la thermodynamique (les équations entre phase).

Bibliothèque ou solveur numérique

C'est la face **cachée** de simulateur (outil informatique considéré boite noire), l'utilisateur doit être conscient que toute simulation consiste à résoudre un système non linéaire d'équation algébrique en régime permanant et en régime transitoire.